自旋半经典朗之万方程一般形式的探讨*

李德彰[1)] 卢智伟[2)] 赵宇军[1)] 杨小宝[1)†]

1)（华南理工大学，物理与光电学院，广州 510640）

2)（瑞典皇家理工学院，工程科学院应用物理系，斯德哥尔摩 SE-10691）

摘 要

有限温度下自旋半经典系统的随机动力学行为通常由随机 Landau-Lifshitz 方程描述. 本文在朗之万随机微分方程的框架内，推导出有效朗之万方程的一般形式，及其对应的 Fokker-Planck 方程的表达式. 该有效朗之万方程能正确描述正则系综下自旋半经典系统的统计物理性质，并且在阻尼项和随机项消失时能退化到自旋半经典运动方程，因此是随机 Landau-Lifshitz 方程的一种推广. 在笛卡尔坐标系和球坐标系中，分别给出有效朗之万方程的一般形式和对应的 Fokker-Planck 方程的显式表达式. 在球坐标系中，讨论了朗之万方程中的纵场效应，并从方程采取的形式中给出是否包含纵场效应的判断依据. 最后，有效朗之万方程在一个单自旋、定值外磁场的体系中进行应用. 对方程采取特定的形式进行简便的求解，并成功得到玻尔兹曼稳定分布，该结果也检验了有效朗之万方程的准确性.

关键词： 随机 Landau-Lifshitz 方程，朗之万方程，Fokker-Planck 方程，玻尔兹曼分布

PACS： 05.20.-y, 05.10.Gg, 02.30.Jr

基金: 广东省基础与应用基础研究基金（批准号：2021A1515010328）、广东省重点领域研发计划（批准号：2020B010183001）和国家自然科学基金（批准号：12074126）资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: scxbyang@scut.edu.cn

第一作者. E-mail: lidezhang907@163.com

1 引 言

自旋是粒子的一种内禀性质，是量子力学导出的结果. 对磁性物质和磁性体系，自旋是必不可少的研究要素. 无论是理论分析、实验观测，还是在计算机技术的高速发展中兴起的计算模拟，研究磁性都需要考虑自旋效应. 本文并不从量子力学的角度研究磁性体系中的自旋效应和磁学性质，而是以统计物理的观点考察自旋系统. 自旋并没有经

典对应，尽管它与经典力学中的角动量有相似之处．因此，本文在半经典近似的框架内，考虑自旋半经典系统的统计物理性质．在该框架内，自旋以半经典力学量来处理．对于自旋半经典系统，本文研究的统计分布是正则系综下的经典玻尔兹曼分布．主要的工具，则是自旋半经典系统的朗之万随机微分方程．

以3维向量$\mathbf{S}$表示半经典系统中的自旋变量．系统的半经典运动方程为[1-5]

$$\frac{d\mathbf{S}}{dt}=\gamma\mathbf{S}\times\left(-\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{S}}\right), \tag{1}$$

这里我们采用笛卡尔坐标$\mathbf{S}=\begin{pmatrix}\mathbf{S}_1\\ \mathbf{S}_2\\ \mathbf{S}_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\mathbf{S}_x\\ \mathbf{S}_y\\ \mathbf{S}_z\end{pmatrix}$的标记．方程中$\mathcal{H}(\mathbf{S})$是系统的哈密顿量，$-\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{S}}$是自旋$\mathbf{S}$的有效场向量，$\gamma$是磁旋比，$\times$是向量叉乘运算．该方程有多种推导和理解的方法，如基于量子力学基本原理的推导[2, 3]，采用泊松括号半经典近似的推导[4]，以及类比经典力学中角动量和力矩之间的关系、从而采用磁力矩的描述[1]等等，这里不具体展开讨论．在有限温度下，描述自旋系统随机运动最常用的工具是随机Landau-Lifshitz方程[6-11]

$$\frac{d\mathbf{S}}{dt}=\gamma\mathbf{S}\times\left(-\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{S}}\right)-\gamma_S\mathbf{S}\times\left[\mathbf{S}\times\left(-\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{S}}\right)\right]+\sqrt{\mu_S}\,\mathbf{S}\times\mathbf{h}(t). \tag{2}$$

这是一个朗之万随机微分方程，在半经典运动方程的基础上加入了阻尼项和随机项．其中γ_S是阻尼因子，$\mathbf{h}(t)$是高斯白噪声随机向量，满足

$$\langle h_i(t)\rangle=0,\ \langle h_i(t)h_j(t')\rangle=\delta_{ij}\delta(t-t') \tag{3}$$

或者等价地

$$\langle\mathbf{h}(t)\rangle=0,\ \langle\mathbf{h}(t)\mathbf{h}^T(t')\rangle=\delta(t-t')\mathbf{1}, \tag{4}$$

$\mathbf{1}$是单位矩阵．随机过程前面的系数$\sqrt{\mu_S}$，一般需要满足涨落-耗散关系$\mu_S=\frac{2\gamma_S}{\beta}$，以保证玻尔兹曼分布$\frac{1}{Z}\exp\left[-\beta\mathcal{H}(\mathbf{S})\right]$是该随机微分方程的稳定解．这里$\beta=1/k_BT$，$k_B$是

玻尔兹曼常数，T 是温度，Z 是归一化常数．随机 Landau-Lifshitz 方程是一个横场的运动方程，方程本身维持自旋的模不变，因此不包含纵场效应．当不加入随机项，或者系统处在零温下随机项消失，剩下半经典运动方程和阻尼项两部分，则随机 Landau-Lifshitz 方程变成决定性的 Landau-Lifshitz-Gilbert 方程[1, 12-15]．

本文的主要研究对象是用于描述自旋半经典变量随机运动的有效朗之万方程．文中将具体讨论该有效朗之万方程的一般形式，及其对应的 Fokker-Planck 方程的稳定解．由此得到的结果，可看作是对随机 Landau-Lifshitz 方程的推广和补充．对有效朗之万方程一般形式的考虑，以满足两点要求为基础：1.以经典的玻尔兹曼分布为稳定分布，从而可以正确描述自旋体系在正则系综下的统计性质；2. 阻尼和随机涨落这两项如果消失，朗之万方程将退化到自旋半经典运动方程(1)式．本文的第 2 节，将在笛卡尔坐标系中根据以上两点要求，推导有效朗之万方程一般形式的表达式．第 3 节将把第 2 节得到的结果，表达成球坐标的形式，得到球坐标系下的有效朗之万方程和对应的 Fokker-Planck 方程．在球坐标系形式下，可以比较简便地讨论和判断朗之万方程中的纵场效应．此外，文中以一个具体的简单系统为例子，展示了选取有效朗之万方程的特定形式并加以求解的过程．选取适当的形式令方程的求解、对系统统计分布的分析变得简便．最后第 4 节是本文的总结．

2 自旋半经典朗之万方程和 Fokker-Planck 方程

考虑一个由朗之万方程描述的系统，以 $\mathbf{S}$ 表示系统的变量．在我们研究的具体例子中，$\mathbf{S}$ 则为自旋向量．朗之万方程一般采用以下形式

$$\frac{d\mathbf{S}}{dt} = \mathbf{a}(\mathbf{S}) + \mathbf{B}(\mathbf{S})\mathbf{h}(t), \tag{5}$$

其中 $\mathbf{a}(\mathbf{S})$ 是与 $\mathbf{S}$ 维数相同的向量，$\mathbf{B}(\mathbf{S})$ 是随机过程 $\mathbf{h}(t)$ 前的系数矩阵，$\mathbf{h}(t)$ 是高斯随机向量，与(2)式中的随机过程性质相同，满足(3)式和(4)式．$\mathbf{h}(t)$ 可看成维纳过程对时

间的形式导数．朗之万方程(5)式，由决定性部分$\mathbf{a}(\mathbf{S})$与随机过程部分$\mathbf{B}(\mathbf{S})\mathbf{h}(t)$组成．如果系数$\mathbf{B}(\mathbf{S})$由系统变量$\mathbf{S}$决定，则该随机部分称为乘性（multiplicative）噪声，否则称为加性（additive）噪声（例如$\mathbf{B}$为常数矩阵）．系统遵循朗之万方程做随机运动时，其含时概率密度分布$\rho(\mathbf{S},t)$的时间演化规律，通常由著名的Fokker-Planck方程来描述．对朗之万方程采取不同的随机积分方式，相应地会导出不同形式的Fokker-Planck方程，最常见的有Itô随机积分形式和Stratonovich随机积分形式．这两种积分形式在处理noise-induced drift项时可能产生差异，由此导出不同表达式的Fokker-Planck方程．对于乘性噪声的随机过程，这个差异不为0，对于加性噪声这个差异则不存在．由于通常在物理应用中Stratonovich随机积分更被青睐，这里我们采取Stratonovich随机积分所导出的形式，该形式的Fokker-Planck方程为[16-19]

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\mathbf{S},t)=-\frac{\partial}{\partial\mathbf{S}}\cdot\left[\mathbf{a}(\mathbf{S})\rho(\mathbf{S},t)\right]+\sum_i\frac{\partial}{\partial\mathbf{S}_i}\left\{\left[\frac{1}{2}\sum_{k,j}\mathbf{B}_{ik}(\mathbf{S})\frac{\partial\mathbf{B}_{jk}(\mathbf{S})}{\partial\mathbf{S}_j}\right]\rho(\mathbf{S},t)\right\}+\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial\mathbf{S}}\cdot\left[\mathbf{B}(\mathbf{S})\mathbf{B}^T(\mathbf{S})\frac{\partial\rho(\mathbf{S},t)}{\partial\mathbf{S}}\right]. \tag{6}$$

这里$\mathbf{S}_i$指$\mathbf{S}$的第i个分量，$\mathbf{B}_{ik}(\mathbf{S})$指$\mathbf{B}(\mathbf{S})$第$i$行第$k$列的矩阵元．容易看出，对于加性噪声的随机过程，方程中右端的第 2 项为 0，剩余部分是 Itô 随机积分与 Stratonovich 随机积分的共同结果．把方程的右端写成时间演化算符$\mathcal{L}$的形式，则

$$\mathcal{L}(\sim)=-\frac{\partial}{\partial\mathbf{S}}\cdot\left[\mathbf{a}(\mathbf{S})(\sim)\right]+\sum_i\frac{\partial}{\partial\mathbf{S}_i}\left\{\left[\frac{1}{2}\sum_{k,j}\mathbf{B}_{ik}(\mathbf{S})\frac{\partial\mathbf{B}_{jk}(\mathbf{S})}{\partial\mathbf{S}_j}\right](\sim)\right\}+\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial\mathbf{S}}\cdot\left[\mathbf{B}(\mathbf{S})\mathbf{B}^T(\mathbf{S})\frac{\partial(\sim)}{\partial\mathbf{S}}\right]. \tag{7}$$

概率密度分布函数$\rho(\mathbf{S},t)$从 0 时刻的初始分布（例如$\rho(\mathbf{S},0)=\delta(\mathbf{S}-\mathbf{S}_0)$）出发，按照Fokker-Planck 方程(6)式进行演化，最终到达长时极限的稳态$\rho(\mathbf{S},\infty)$，也就是Fokker-Planck 方程的稳定解．通常称$\rho(\mathbf{S},\infty)$为稳定分布或不变分布，本文以$\rho_{\mathrm{st}}(\mathbf{S})$标记稳定分布，下标 st 表示稳定（stationary）．显然$\rho_{\mathrm{st}}(\mathbf{S})$对时间的导数是 0，因此把$\rho_{\mathrm{st}}(\mathbf{S})$代入 Fokker-Planck 方程(6)式的右端结果是 0，即$\mathcal{L}\rho_{\mathrm{st}}(\mathbf{S})=0$．

本文研究的系统是自旋半经典系统．本文的研究框架是探讨适用于自旋半经典系统

的朗之万方程，使其以经典玻尔兹曼分布为稳定解，并在阻尼项和随机项消失时能回到自旋半经典运动方程(1)式．由此出发，针对自旋系统这一具体例子，朗之万方程的形式可以定为

$$\frac{d\mathbf{S}}{dt}=\gamma\mathbf{S}\times\left(-\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{S}}\right)+\gamma_S\mathbf{a}(\mathbf{S})+\sqrt{\mu_S}\mathbf{B}(\mathbf{S})\mathbf{h}(t). \tag{8}$$

半经典运动方程和阻尼项一起构成方程的决定性部分，γ_S 是阻尼系数．随机部分仍然写成系数矩阵 $\mathbf{B}(\mathbf{S})$ 与高斯白噪声随机向量 $\mathbf{h}(t)$ 的乘积，为方便起见我们加入了一个常数系数 $\sqrt{\mu_S}$ ，类似随机 Landau-Lifshitz 方程(2)式．朗之万方程采取这种形式，显然满足在阻尼和随机两部分消失时回到半经典运动方程(1)式的要求．再分析其对应的 Fokker-Planck 方程．根据(6)式可以直接写出

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\rho(\mathbf{S},t)=&-\frac{\partial}{\partial\mathbf{S}}\cdot\left[\gamma\mathbf{S}\times\left(-\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{S}}\right)\rho(\mathbf{S},t)\right]-\frac{\partial}{\partial\mathbf{S}}\cdot\left[\gamma_S\mathbf{a}(\mathbf{S})\rho(\mathbf{S},t)\right]\\&+\frac{1}{2}\mu_S\sum_i\frac{\partial}{\partial\mathbf{S}_i}\left\{\left[\sum_{k,j}\mathbf{B}_{ik}(\mathbf{S})\frac{\partial\mathbf{B}_{jk}(\mathbf{S})}{\partial\mathbf{S}_j}\right]\rho(\mathbf{S},t)\right\}+\frac{1}{2}\mu_S\frac{\partial}{\partial\mathbf{S}}\cdot\left[\mathbf{B}(\mathbf{S})\mathbf{B}^T(\mathbf{S})\frac{\partial\rho(\mathbf{S},t)}{\partial\mathbf{S}}\right].\end{aligned}\tag{9}$$

定义向量

$$\mathbf{b}(\mathbf{S})=\begin{pmatrix}\mathbf{b}_1(\mathbf{S})\\\mathbf{b}_2(\mathbf{S})\\\mathbf{b}_3(\mathbf{S})\end{pmatrix},\ \mathbf{b}_k(\mathbf{S})=\sum_j\frac{\partial\mathbf{B}_{jk}(\mathbf{S})}{\partial\mathbf{S}_j}. \tag{10}$$

则(9)式右端第 3 项显然有

$$\sum_{k,j}\mathbf{B}_{ik}(\mathbf{S})\frac{\partial\mathbf{B}_{jk}(\mathbf{S})}{\partial\mathbf{S}_j}=\sum_k\mathbf{B}_{ik}(\mathbf{S})\sum_j\frac{\partial\mathbf{B}_{jk}(\mathbf{S})}{\partial\mathbf{S}_j}=\sum_k\mathbf{B}_{ik}(\mathbf{S})\mathbf{b}_k(\mathbf{S})=\left[\mathbf{B}(\mathbf{S})\mathbf{b}(\mathbf{S})\right]_i, \tag{11}$$

于是可以把(9)式写成更紧凑的形式

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\rho(\mathbf{S},t)=&-\frac{\partial}{\partial\mathbf{S}}\cdot\left[\gamma\mathbf{S}\times\left(-\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{S}}\right)\rho(\mathbf{S},t)\right]\\&+\frac{\partial}{\partial\mathbf{S}}\cdot\left\{-\gamma_S\mathbf{a}(\mathbf{S})\rho(\mathbf{S},t)+\frac{1}{2}\mu_S\left[\mathbf{B}(\mathbf{S})\mathbf{b}(\mathbf{S})\rho(\mathbf{S},t)+\mathbf{B}(\mathbf{S})\mathbf{B}^T(\mathbf{S})\frac{\partial\rho(\mathbf{S},t)}{\partial\mathbf{S}}\right]\right\}.\end{aligned}\tag{12}$$

系统的含时概率密度函数 $\rho(\mathbf{S},t)$ 满足这个时间演化方程．对 $\rho(\mathbf{S},t)$ 要求其长时极限下的

稳定解 $\rho_{\text{st}}(\mathbf{S})$ 是玻尔兹曼分布 $\frac{1}{Z}\exp\left[-\beta\mathcal{H}(\mathbf{S})\right]$．把 $\rho_{\text{st}}(\mathbf{S})$ 按照玻尔兹曼分布的具体形式代入右端，结果应该为 0，即

$$-\frac{\partial}{\partial\mathbf{S}}\cdot\left[\gamma\frac{1}{\beta}\mathbf{S}\times\frac{\partial\rho_{\text{st}}(\mathbf{S})}{\partial\mathbf{S}}\right]$$
$$+\frac{\partial}{\partial\mathbf{S}}\cdot\left\{\left[-\gamma_S\mathbf{a}(\mathbf{S})+\frac{1}{2}\mu_S\mathbf{B}(\mathbf{S})\mathbf{b}(\mathbf{S})+\frac{1}{2}\mu_S\beta\mathbf{B}(\mathbf{S})\mathbf{B}^T(\mathbf{S})\left(-\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{S}}\right)\right]\rho_{\text{st}}(\mathbf{S})\right\}=0. \tag{13}$$

其中的第 1 项，由向量代数分析不难得出为 0．第 2 项要保证为 0，一个自然的选择方式是

$$\mathbf{a}(\mathbf{S})=\mathbf{B}(\mathbf{S})\mathbf{B}^T(\mathbf{S})\left(-\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{S}}\right)+\frac{1}{\beta}\mathbf{B}(\mathbf{S})\mathbf{b}(\mathbf{S}) \tag{14}$$

以及

$$\mu_S=\frac{2\gamma_S}{\beta}. \tag{15}$$

(15)式是涨落-耗散关系．这样，则满足以玻尔兹曼分布为该 Fokker-Planck 方程的稳定解．这时朗之万方程的表达式(8)式可具体写为

$$\frac{d\mathbf{S}}{dt}=\gamma\mathbf{S}\times\left(-\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{S}}\right)+\gamma_S\left[\mathbf{B}(\mathbf{S})\mathbf{B}^T(\mathbf{S})\left(-\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{S}}\right)+\frac{1}{\beta}\mathbf{B}(\mathbf{S})\mathbf{b}(\mathbf{S})\right]+\sqrt{\frac{2\gamma_S}{\beta}}\mathbf{B}(\mathbf{S})\mathbf{h}(t). \tag{16}$$

同时相对应的 Fokker-Planck 方程的表达式可以整理成

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\mathbf{S},t)=-\frac{\partial}{\partial\mathbf{S}}\cdot\left[\gamma\mathbf{S}\times\left(-\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{S}}\right)\rho(\mathbf{S},t)\right.$$
$$\left.+\gamma_S\mathbf{B}(\mathbf{S})\mathbf{B}^T(\mathbf{S})\left(-\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{S}}\right)\rho(\mathbf{S},t)-\frac{\gamma_S}{\beta}\mathbf{B}(\mathbf{S})\mathbf{B}^T(\mathbf{S})\frac{\partial\rho(\mathbf{S},t)}{\partial\mathbf{S}}\right]. \tag{17}$$

(16)式和(17)式，是一个有效的统一框架，表达式中的矩阵 $\mathbf{B}(\mathbf{S})$ 待定．适当地选取矩阵 $\mathbf{B}(\mathbf{S})$，均可以得到描述自旋半经典系统在正则系综下统计行为的有效朗之万方程．这是本文在笛卡尔坐标系中得到的主要结果．

容易验证，如果选取矩阵 $\mathbf{B}(\mathbf{S})$ 为

$$\mathbf{B}(\mathbf{S})=\begin{bmatrix} 0 & -\mathbf{S}_z & \mathbf{S}_y \\ \mathbf{S}_z & 0 & -\mathbf{S}_x \\ -\mathbf{S}_y & \mathbf{S}_x & 0 \end{bmatrix}, \tag{18}$$

则对任意向量$\mathbf{y}$有

$$\mathbf{B}(\mathbf{S})\mathbf{y}=\mathbf{S}\times\mathbf{y},\ \mathbf{B}^T(\mathbf{S})\mathbf{y}=-\mathbf{B}(\mathbf{S})\mathbf{y}=-\mathbf{S}\times\mathbf{y}, \tag{19}$$

同时有$\mathbf{b}(\mathbf{S})=0$．朗之万方程(16)式这时变成

$$\frac{d\mathbf{S}}{dt}=\gamma\mathbf{S}\times\left(-\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{S}}\right)-\gamma_S\mathbf{S}\times\left[\mathbf{S}\times\left(-\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{S}}\right)\right]+\sqrt{\frac{2\gamma_S}{\beta}}\mathbf{S}\times\mathbf{h}(t). \tag{20}$$

这正是随机 Landau-Lifshitz 方程(2)式．可见随机 Landau-Lifshitz 方程可以看作是这里得到的有效朗之万方程的一种具体形式，本文把(18)式中对$\mathbf{B}(\mathbf{S})$的选取标记为$\mathbf{B}_{\mathrm{LL}}(\mathbf{S})$．同时可以把$\mathbf{B}_{\mathrm{LL}}(\mathbf{S})$代入(17)式，直接写出其 Fokker-Planck 方程的显式表达式

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\rho(\mathbf{S},t)=-\frac{\partial}{\partial\mathbf{S}}\cdot\Bigg\{&\gamma\mathbf{S}\times\left(-\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{S}}\right)\rho(\mathbf{S},t)\\ &-\gamma_S\mathbf{S}\times\left[\mathbf{S}\times\left(-\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{S}}\right)\right]\rho(\mathbf{S},t)+\frac{\gamma_S}{\beta}\mathbf{S}\times\left[\mathbf{S}\times\frac{\partial\rho(\mathbf{S},t)}{\partial\mathbf{S}}\right]\Bigg\}.\end{aligned} \tag{21}$$

之前的很多研究工作，已经对该表达式进行了详细的推导和分析[8, 20-25]，这里可把它看作一个统一框架的一种具体的形式．

3 有效朗之万方程的球坐标形式

分析随机 Landau-Lifshitz 方程(20)式，不难看出，自旋变量的模$|\mathbf{S}|$在方程中保持不变，因为$\mathbf{S}$随时间的变元在方向上与$\mathbf{S}$垂直，$|\mathbf{S}|$在时间演化中不发生改变．于是求解随机 Landau-Lifshitz 方程，将得到$\mathbf{S}$在一个固定半径的球面上的概率分布．这表明随机 Landau-Lifshitz 方程只包含横场作用，而没有纵场效应．对于球面上的概率分布，一个自然的想法是把系统变换到球坐标系下，分析随机微分方程的形式及其对应的概率密度函数．本节将推导球坐标系中有效朗之万方程的一般形式，得到其对应的 Fokker-Planck 方程，并判断朗之万方程中是否体现纵场效应．

3.1 球坐标系中的有效朗之万方程和 Fokker-Planck 方程

对自旋向量$\mathbf{S}$，其球坐标表示为$\begin{pmatrix} S \\ \theta \\ \varphi \end{pmatrix}$，其中 S 是$\mathbf{S}$的模，θ是$\mathbf{S}$与笛卡尔坐标系中 z 轴的夹角$(0 \le \theta \le \pi)$，φ是$\mathbf{S}$在 xy 平面上的投影向量与 x 轴的夹角$(0 \le \varphi < 2\pi)$．为方便起见，标记$\mathbf{S}_{\text{sph}} = \begin{pmatrix} S \\ \theta \\ \varphi \end{pmatrix}$，下标 sph 表示 spherical．球坐标变量与笛卡尔坐标变量间的关系为

$$\mathbf{S}_x = S\sin\theta\cos\varphi,\ \mathbf{S}_y = S\sin\theta\sin\varphi,\ \mathbf{S}_z = S\cos\theta. \tag{22}$$

坐标变换的雅可比矩阵及其逆矩阵分别是

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbf{S}_x}{\partial S} & \frac{\partial \mathbf{S}_x}{\partial \theta} & \frac{\partial \mathbf{S}_x}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial \mathbf{S}_y}{\partial S} & \frac{\partial \mathbf{S}_y}{\partial \theta} & \frac{\partial \mathbf{S}_y}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial \mathbf{S}_z}{\partial S} & \frac{\partial \mathbf{S}_z}{\partial \theta} & \frac{\partial \mathbf{S}_z}{\partial \varphi} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sin\theta\cos\varphi & S\cos\theta\cos\varphi & -S\sin\theta\sin\varphi \\ \sin\theta\sin\varphi & S\cos\theta\sin\varphi & S\sin\theta\cos\varphi \\ \cos\theta & -S\sin\theta & 0 \end{bmatrix}, \tag{23}$$

和

$$\mathbf{C}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{\partial S}{\partial \mathbf{S}_x} & \frac{\partial S}{\partial \mathbf{S}_y} & \frac{\partial S}{\partial \mathbf{S}_z} \\ \frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{S}_x} & \frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{S}_y} & \frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{S}_z} \\ \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{S}_x} & \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{S}_y} & \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{S}_z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sin\theta\cos\varphi & \sin\theta\sin\varphi & \cos\theta \\ \frac{1}{S}\cos\theta\cos\varphi & \frac{1}{S}\cos\theta\sin\varphi & -\frac{1}{S}\sin\theta \\ -\frac{1}{S\sin\theta}\sin\varphi & \frac{1}{S\sin\theta}\cos\varphi & 0 \end{bmatrix}. \tag{24}$$

$|\mathbf{C}| = S^2\sin\theta$是坐标变换的雅可比行列式．对球坐标$\mathbf{S}_{\text{sph}}$，玻尔兹曼分布的形式为

$$\rho_{\text{sph}}\left(\mathbf{S}_{\text{sph}}\right) = \frac{1}{Z}\exp\left[-\beta\mathcal{H}(\mathbf{S})\right]S^2\sin\theta = \frac{1}{Z}\exp\left[-\beta\mathcal{H}_{\text{sph}}\left(\mathbf{S}_{\text{sph}}\right)\right], \tag{25}$$

其中定义有效的球坐标哈密顿量

$$\mathcal{H}_{\text{sph}}\left(\mathbf{S}_{\text{sph}}\right) = \mathcal{H}(\mathbf{S}) - \frac{1}{\beta}\ln\left(S^2\sin\theta\right). \tag{26}$$

利用变换矩阵，可以方便地把上一节得到的朗之万方程(16)式转换到球坐标系

$$\frac{d\mathbf{S}_{\mathrm{sph}}}{dt}=\mathbf{C}^{-1}\frac{d\mathbf{S}}{dt}=\gamma\mathbf{C}^{-1}\left[\mathbf{S}\times\left(-\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{S}}\right)\right]+\gamma_S\left[\mathbf{D}\mathbf{D}^T\mathbf{C}^T\left(-\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{S}}\right)+\frac{1}{\beta}\mathbf{D}\mathbf{b}(\mathbf{S})\right]+\sqrt{\frac{2\gamma_S}{\beta}}\mathbf{D}\mathbf{h}(t),\quad(27)$$

这里定义$\mathbf{D}=\mathbf{C}^{-1}\mathbf{B}$．逐项分析上式的右端．首先对应随机 Landau-Lifshitz 方程中的$\mathbf{B}_{\mathrm{LL}}$［见(18)式］，有

$$\mathbf{D}_{\mathrm{LL}}=\mathbf{C}^{-1}\mathbf{B}_{\mathrm{LL}}=\begin{bmatrix}0&0&0\\ \sin\varphi&-\cos\varphi&0\\ \cot\theta\cos\varphi&\cot\theta\sin\varphi&-1\end{bmatrix}.\tag{28}$$

容易验证

$$\mathbf{D}_{\mathrm{LL}}=\frac{1}{S\sin\theta}\begin{bmatrix}0&0&0\\ -\frac{\partial\mathbf{S}_x}{\partial\varphi}&-\frac{\partial\mathbf{S}_y}{\partial\varphi}&-\frac{\partial\mathbf{S}_z}{\partial\varphi}\\ \frac{\partial\mathbf{S}_x}{\partial\theta}&\frac{\partial\mathbf{S}_y}{\partial\theta}&\frac{\partial\mathbf{S}_z}{\partial\theta}\end{bmatrix}.\tag{29}$$

于是(27)式右端第 1 项为

$$\begin{aligned}\gamma\mathbf{C}^{-1}\left[\mathbf{S}\times\left(-\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{S}}\right)\right]&=\gamma\mathbf{C}^{-1}\mathbf{B}_{\mathrm{LL}}\left(-\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{S}}\right)=\gamma\mathbf{D}_{\mathrm{LL}}\left(-\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{S}}\right)\\&=\gamma\frac{1}{S\sin\theta}\begin{bmatrix}0&0&0\\ -\frac{\partial\mathbf{S}_x}{\partial\varphi}&-\frac{\partial\mathbf{S}_y}{\partial\varphi}&-\frac{\partial\mathbf{S}_z}{\partial\varphi}\\ \frac{\partial\mathbf{S}_x}{\partial\theta}&\frac{\partial\mathbf{S}_y}{\partial\theta}&\frac{\partial\mathbf{S}_z}{\partial\theta}\end{bmatrix}\left(-\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{S}}\right)=\gamma\frac{1}{S\sin\theta}\begin{pmatrix}0\\ \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\varphi}\\ -\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\theta}\end{pmatrix}.\end{aligned}\tag{30}$$

对第 2 项，首先有

$$\mathbf{C}^T\left(-\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{S}}\right)=\begin{bmatrix}\frac{\partial\mathbf{S}_x}{\partial S}&\frac{\partial\mathbf{S}_y}{\partial S}&\frac{\partial\mathbf{S}_z}{\partial S}\\ \frac{\partial\mathbf{S}_x}{\partial\theta}&\frac{\partial\mathbf{S}_y}{\partial\theta}&\frac{\partial\mathbf{S}_z}{\partial\theta}\\ \frac{\partial\mathbf{S}_x}{\partial\varphi}&\frac{\partial\mathbf{S}_y}{\partial\varphi}&\frac{\partial\mathbf{S}_z}{\partial\varphi}\end{bmatrix}\left(-\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{S}}\right)=-\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{S}_{\mathrm{sph}}}.\tag{31}$$

再分析向量$\mathbf{b}(\mathbf{S})$．在(10)式中定义了$\mathbf{b}(\mathbf{S})$的元素，这里用球坐标变量来表示$\mathbf{b}(\mathbf{S})$

$$
\begin{aligned}
\mathbf{b}_k(\mathbf{S}) &= \sum_j \frac{\partial \mathbf{B}_{jk}}{\partial \mathbf{S}_j} = \sum_j \sum_i \frac{\partial \mathbf{B}_{jk}}{\partial \mathbf{S}_{\text{sph},i}} \frac{\partial \mathbf{S}_{\text{sph},i}}{\partial \mathbf{S}_j} = \sum_j \sum_i \frac{\partial \mathbf{B}_{jk}}{\partial \mathbf{S}_{\text{sph},i}} \mathbf{C}_{ij}^{-1} \\
&= \sum_j \sum_i \frac{\partial \left(\sum_l \mathbf{C}_{jl} \mathbf{D}_{lk} \right)}{\partial \mathbf{S}_{\text{sph},i}} \mathbf{C}_{ij}^{-1} = \sum_l \sum_i \frac{\partial \mathbf{D}_{lk}}{\partial \mathbf{S}_{\text{sph},i}} \sum_j \mathbf{C}_{ij}^{-1} \mathbf{C}_{jl} + \sum_l \mathbf{D}_{lk} \sum_i \sum_j \frac{\partial \mathbf{C}_{jl}}{\partial \mathbf{S}_{\text{sph},i}} \mathbf{C}_{ij}^{-1} \\
&= \sum_l \sum_i \frac{\partial \mathbf{D}_{lk}}{\partial \mathbf{S}_{\text{sph},i}} \delta_{il} + \sum_l \mathbf{D}_{kl}^T \sum_i \sum_j \frac{\partial \mathbf{C}_{jl}}{\partial \mathbf{S}_{\text{sph},i}} \frac{\partial \mathbf{S}_{\text{sph},i}}{\partial \mathbf{S}_j} = \sum_l \frac{\partial \mathbf{D}_{lk}}{\partial \mathbf{S}_{\text{sph},l}} + \sum_l \mathbf{D}_{kl}^T \sum_j \frac{\partial \mathbf{C}_{jl}}{\partial \mathbf{S}_j} \\
&= \sum_l \frac{\partial \mathbf{D}_{lk}}{\partial \mathbf{S}_{\text{sph},l}} + \mathbf{D}_k^T \begin{pmatrix} 2/S \\ \cot\theta \\ 0 \end{pmatrix},
\end{aligned} \tag{32}
$$

最后一步用 $\mathbf{D}_k^T$ 表示 $\mathbf{D}^T$ 的第 k 行，并利用了从(23)式导出的结果

$$
\begin{pmatrix} \sum_j \frac{\partial \mathbf{C}_{j1}}{\partial \mathbf{S}_j} \\ \sum_j \frac{\partial \mathbf{C}_{j2}}{\partial \mathbf{S}_j} \\ \sum_j \frac{\partial \mathbf{C}_{j3}}{\partial \mathbf{S}_j} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2/S \\ \cot\theta \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{33}
$$

由(32)式显然可以把向量 $\mathbf{b}(\mathbf{S})$ 表达成更紧凑的形式

$$
\mathbf{b}(\mathbf{S}) = \mathbf{d}(\mathbf{S}_{\text{sph}}) + \mathbf{D}^T \begin{pmatrix} 2/S \\ \cot\theta \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{34}
$$

其中定义向量 $\mathbf{d}(\mathbf{S}_{\text{sph}})$ 为

$$
\mathbf{d}(\mathbf{S}_{\text{sph}}) = \begin{pmatrix} \mathbf{d}_1(\mathbf{S}_{\text{sph}}) \\ \mathbf{d}_2(\mathbf{S}_{\text{sph}}) \\ \mathbf{d}_3(\mathbf{S}_{\text{sph}}) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{d}_k(\mathbf{S}_{\text{sph}}) = \sum_l \frac{\partial \mathbf{D}_{lk}}{\partial \mathbf{S}_{\text{sph},l}}. \tag{35}
$$

可以看出定义方式与 $\mathbf{b}(\mathbf{S})$ 在笛卡尔坐标系中的形式相似．现在把(30)、(31)和(34)式代入(27)，得到

$$
\begin{aligned}
\frac{d\mathbf{S}_{\text{sph}}}{dt} &= \gamma\frac{1}{S\sin\theta}\begin{pmatrix}0\\ \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\varphi}\\ -\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\theta}\end{pmatrix}+\gamma_S\left\{\mathbf{DD}^T\left[\left(-\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{S}_{\text{sph}}}\right)+\frac{1}{\beta}\begin{pmatrix}2/S\\ \cot\theta\\ 0\end{pmatrix}\right]+\frac{1}{\beta}\mathbf{Dd}\left(\mathbf{S}_{\text{sph}}\right)\right\}+\sqrt{\frac{2\gamma_S}{\beta}}\mathbf{Dh}(t)\\
&= \gamma\frac{1}{S\sin\theta}\begin{pmatrix}0\\ \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\varphi}\\ -\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\theta}\end{pmatrix}+\gamma_S\left[\mathbf{DD}^T\left(-\frac{\partial\mathcal{H}_{\text{sph}}}{\partial\mathbf{S}_{\text{sph}}}\right)+\frac{1}{\beta}\mathbf{Dd}\left(\mathbf{S}_{\text{sph}}\right)\right]+\sqrt{\frac{2\gamma_S}{\beta}}\mathbf{Dh}(t).
\end{aligned}
\tag{36}
$$

这是有效朗之万方程(16)式的球坐标形式．对矩阵 $\mathbf{B}$ 的选取，现在转化为对 $\mathbf{D}$ 的选取．对应随机 Landau-Lifshitz 方程的取法，是(28)式中的 $\mathbf{D}_{\text{LL}}$．这时含时概率密度函数 $\rho_{\text{sph}}\left(\mathbf{S}_{\text{sph}},t\right)$ 的时间演化，则满足球坐标系的 Fokker-Planck 方程．与第 2 节的分析完全类似地，可以得到(36)式对应的球坐标系 Fokker-Planck 方程

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}\rho_{\text{sph}}\left(\mathbf{S}_{\text{sph}},t\right) = -\frac{\partial}{\partial\mathbf{S}_{\text{sph}}}\cdot\Bigg[&\gamma\frac{1}{S\sin\theta}\begin{pmatrix}0\\ \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\varphi}\\ -\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\theta}\end{pmatrix}\rho_{\text{sph}}\left(\mathbf{S}_{\text{sph}},t\right)\\
&+\gamma_S\mathbf{DD}^T\left(-\frac{\partial\mathcal{H}_{\text{sph}}}{\partial\mathbf{S}_{\text{sph}}}\right)\rho_{\text{sph}}\left(\mathbf{S}_{\text{sph}},t\right)-\frac{\gamma_S}{\beta}\mathbf{DD}^T\frac{\partial\rho_{\text{sph}}\left(\mathbf{S}_{\text{sph}},t\right)}{\partial\mathbf{S}_{\text{sph}}}\Bigg].
\end{aligned}
\tag{37}
$$

不难检验，球坐标的玻尔兹曼分布(25)式是该 Fokker-Planck 方程的稳定解．把(25)式代入(37)式右端，得到

$$
-\frac{\partial}{\partial\mathbf{S}_{\text{sph}}}\cdot\left[\gamma S\begin{pmatrix}0\\ -\frac{1}{\beta Z}\frac{\partial e^{-\beta\mathcal{H}}}{\partial\varphi}\\ \frac{1}{\beta Z}\frac{\partial e^{-\beta\mathcal{H}}}{\partial\theta}\end{pmatrix}+\gamma_S\mathbf{DD}^T\left(-\frac{\partial\mathcal{H}_{\text{sph}}}{\partial\mathbf{S}_{\text{sph}}}\right)\rho_{\text{sph}}\left(\mathbf{S}_{\text{sph}}\right)-\gamma_S\mathbf{DD}^T\left(-\frac{\partial\mathcal{H}_{\text{sph}}}{\partial\mathbf{S}_{\text{sph}}}\right)\rho_{\text{sph}}\left(\mathbf{S}_{\text{sph}}\right)\right], \tag{38}
$$

结果显然是 0．这表明该朗之万方程在球坐标系中的有效性．(36)式和(37)式，是有效朗

之万方程及其 Fokker-Planck 方程的一般形式(16)和(17)，在球坐标系中的表现形式．这是本文在球坐标系中得到的主要结果．

3.2 纵场效应的讨论

从球坐标形式的有效朗之万方程(36)式可以直接看出，如果只有横场作用，保持模 S 守恒，则必须满足矩阵 $\mathbf{D}$ 的第 1 行是零向量．随机 Landau-Lifshitz 方程的 $\mathbf{D}_{\mathrm{LL}}$ [见(28)式]，是满足该条件的一个例子．把随机 Landau-Lifshitz 方程对应的球坐标形式显式地写出

$$\frac{d\mathbf{S}_{\mathrm{sph}}}{dt}=\gamma\frac{1}{S\sin\theta}\begin{pmatrix}0\\ \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\varphi}\\ -\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\theta}\end{pmatrix}+\gamma_S\begin{pmatrix}0\\ -\frac{\partial\mathcal{H}_{\mathrm{sph}}}{\partial\theta}-\frac{1}{\beta}\cot\theta\\ -\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial\mathcal{H}_{\mathrm{sph}}}{\partial\varphi}\end{pmatrix}+\sqrt{\frac{2\gamma_S}{\beta}}\begin{bmatrix}0 & 0 & 0\\ \sin\varphi & -\cos\varphi & 0\\ \cot\theta\cos\varphi & \cot\theta\sin\varphi & -1\end{bmatrix}\mathbf{h}(t).\quad(39)$$

显然 $\frac{dS}{dt}=0$，S 是常数，方程转化成两个角度变量的随机微分方程

$$\begin{aligned}\frac{d\theta}{dt}&=\gamma\frac{1}{S\sin\theta}\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\varphi}-\gamma_S\left(\frac{\partial\mathcal{H}_{\mathrm{sph}}}{\partial\theta}+\frac{1}{\beta}\cot\theta\right)+\sqrt{\frac{2\gamma_S}{\beta}}\left[\sin\varphi\mathbf{h}_1(t)-\cos\varphi\mathbf{h}_2(t)\right]\\ \frac{d\varphi}{dt}&=-\gamma\frac{1}{S\sin\theta}\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\theta}-\gamma_S\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial\mathcal{H}_{\mathrm{sph}}}{\partial\varphi}+\sqrt{\frac{2\gamma_S}{\beta}}\left[\cot\theta\cos\varphi\mathbf{h}_1(t)+\cot\theta\sin\varphi\mathbf{h}_2(t)-\mathbf{h}_3(t)\right].\end{aligned}\quad(40)$$

相应地，概率密度函数 $\rho_{\mathrm{sph}}(\theta,\varphi,t)$ 只包含两个角度变量和时间变量，Fokker-Planck 方程可整理得到

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\rho_{\mathrm{sph}}&=-\frac{\partial}{\partial\mathbf{S}_{\mathrm{sph}}}\cdot\left[\gamma\frac{1}{S\sin\theta}\begin{pmatrix}0\\ \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\varphi}\\ -\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\theta}\end{pmatrix}\rho_{\mathrm{sph}}+\gamma_S\begin{pmatrix}0\\ -\frac{\partial\mathcal{H}_{\mathrm{sph}}}{\partial\theta}\\ -\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial\mathcal{H}_{\mathrm{sph}}}{\partial\varphi}\end{pmatrix}\rho_{\mathrm{sph}}-\frac{\gamma_S}{\beta}\begin{pmatrix}0\\ \frac{\partial\rho_{\mathrm{sph}}}{\partial\theta}\\ \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial\rho_{\mathrm{sph}}}{\partial\varphi}\end{pmatrix}\right]\\ &=\frac{\partial}{\partial\theta}\left[-\gamma\frac{1}{S\sin\theta}\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\varphi}\rho_{\mathrm{sph}}+\gamma_S\frac{\partial\mathcal{H}_{\mathrm{sph}}}{\partial\theta}\rho_{\mathrm{sph}}+\frac{\gamma_S}{\beta}\frac{\partial\rho_{\mathrm{sph}}}{\partial\theta}\right]\\ &\quad+\frac{\partial}{\partial\varphi}\left[\gamma\frac{1}{S\sin\theta}\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\theta}\rho_{\mathrm{sph}}+\gamma_S\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial\mathcal{H}_{\mathrm{sph}}}{\partial\varphi}\rho_{\mathrm{sph}}+\frac{\gamma_S}{\beta}\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial\rho_{\mathrm{sph}}}{\partial\varphi}\right].\end{aligned}\quad(41)$$

这个结果已经被很多工作分析和讨论过[22, 26-34]．矩阵 $\mathbf{D}$ 的第 1 行如果不是零向量，则朗之万方程中包含纵场效应，模 S 不能保持不变．在文献[35]中，作者提出了一个包含纵场涨落的朗之万方程，并说明随机 Landau-Lifshitz 方程是该方程在以 S 为半径的球面上的投影．在本文的框架中，该方程是(16)式对矩阵 $\mathbf{B}$ 简单选取为 $\mathbf{B}=\mathbf{1}$ 得到的结果，或者等价地在球坐标系中选取 $\mathbf{D}=\mathbf{C}^{-1}$．这样选取的矩阵 $\mathbf{D}$ 的第 1 行显然不是零向量，因此方程中包含纵场效应．除了朗之万方程以外，纵场效应的研究也可见于蒙特卡洛模拟的相关工作中[36].

如果只考虑横场作用，有效朗之万方程也可以采取随机 Landau-Lifshitz 方程以外的形式．在文献[32]中，作者采用了

$$\mathbf{D}=\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \dfrac{1}{\sin\theta} \end{bmatrix} \tag{42}$$

而得到

$$\begin{aligned} \frac{d\theta}{dt} &= \gamma\frac{1}{S\sin\theta}\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\varphi}-\gamma_S\frac{\partial\mathcal{H}_{\mathrm{sph}}}{\partial\theta}+\sqrt{\frac{2\gamma_S}{\beta}}\mathbf{h}_1(t) \\ \frac{d\varphi}{dt} &= -\gamma\frac{1}{S\sin\theta}\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\theta}-\gamma_S\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial\mathcal{H}_{\mathrm{sph}}}{\partial\varphi}+\sqrt{\frac{2\gamma_S}{\beta}}\frac{1}{\sin\theta}\mathbf{h}_2(t). \end{aligned} \tag{43}$$

可以看出，该形式的朗之万方程与随机 Landau-Lifshitz 方程(40)式相比，两个角度变量在动力学演化时都发生耦合，即运动方程不独立．主要区别则在随机部分，该方程只需要一个 2 维的高斯随机向量场，随机 Landau-Lifshitz 方程则需要完整的 3 维高斯随机过程．对该方程具体的分析和数值计算，这里不详细讨论．

3.3 简单的应用

本文已经得到适用于自旋半经典系统的有效朗之万方程的一般形式，在笛卡尔坐标系和球坐标系中分别展示了有效朗之万方程及其对应的 Fokker-Planck 方程的表达式．对

于具体的系统、具体的哈密顿量，选取特定的形式可能会令方程的求解变得简便．本节将讨论一种较为简单的体系，对该体系选取有效朗之万方程的一种形式并加以求解．

考虑一个单自旋的系统，处于定值外磁场 $\mathbf{H}$ 当中，系统的哈密顿量为自旋与外场的相互作用

$$\mathcal{H}(\mathbf{S}) = -\mathbf{S}\cdot\mathbf{H}. \tag{44}$$

由于 $\mathbf{H}$ 是定值向量，为方便起见可把 $\mathbf{H}$ 的方向设为 z 轴正方向，则哈密顿量为 $\mathcal{H} = -SH\cos\theta$，不包含 φ．球坐标哈密顿量有简单的形式

$$\mathcal{H}_{\text{sph}}(\mathbf{S}_{\text{sph}}) = -SH\cos\theta - \frac{1}{\beta}\ln\left(S^2\sin\theta\right). \tag{45}$$

代入有效朗之万方程的一般形式(36)式，得到

$$\frac{d\mathbf{S}_{\text{sph}}}{dt} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\gamma H \end{pmatrix} + \gamma_S \left[\mathbf{D}\mathbf{D}^T \begin{pmatrix} \frac{1}{\beta}\frac{2}{S} \\ -SH\sin\theta + \frac{1}{\beta}\cot\theta \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{\beta}\mathbf{D}\mathbf{d}\left(\mathbf{S}_{\text{sph}}\right) \right] + \sqrt{\frac{2\gamma_S}{\beta}}\mathbf{D}\mathbf{h}(t). \tag{46}$$

为确保系统有合法的玻尔兹曼分布，我们不引入纵场效应，于是 S 是常数，同时系统的玻尔兹曼分布中不显含 φ．对矩阵 $\mathbf{D}$，我们选取非常简单的形式

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \tag{47}$$

由此得到的朗之万方程的具体表达式为

$$\begin{aligned} \frac{d\theta}{dt} &= -\gamma_S\left(SH\sin\theta - \frac{1}{\beta}\cot\theta\right) + \sqrt{\frac{2\gamma_S}{\beta}}\mathbf{h}_1(t) \\ \frac{d\varphi}{dt} &= -\gamma H + \sqrt{\frac{2\gamma_S}{\beta}}\mathbf{h}_2(t). \end{aligned} \tag{48}$$

可以看到，两个角度变量的运动方程是独立的朗之万方程．对这两个方程分别求解，就得到 θ 和 φ 各自的概率分布．

首先分析 θ 的运动方程

$$\frac{d\theta}{dt}=-\gamma_S\left(SH\sin\theta-\frac{1}{\beta}\cot\theta\right)+\sqrt{\frac{2\gamma_S}{\beta}}\mathbf{h}_1(t)=-\gamma_S\frac{\partial\mathcal{H}_{\text{sph}}}{\partial\theta}+\sqrt{\frac{2\gamma_S}{\beta}}\mathbf{h}_1(t). \tag{49}$$

这是一个过阻尼形式（overdamped）的朗之万方程．显然，这个方程有加性噪声的随机过程，随机项前面的系数和阻尼因子满足涨落–耗散关系．利用第 2 节的分析方法，容易知道该朗之万方程得到的稳定分布是θ的玻尔兹曼分布$\frac{1}{\tilde{Z}}\exp\left[-\beta\mathcal{H}_{\text{sph}}(\theta)\right]$. 再看$\varphi$的运动方程

$$\frac{d\varphi}{dt}=-\gamma H+\sqrt{\frac{2\gamma_S}{\beta}}\mathbf{h}_2(t). \tag{50}$$

这个方程的形式解可以直接写出

$$\varphi(t)=\varphi_0-\gamma Ht+\sqrt{\frac{2\gamma_S}{\beta}}\int_0^t\mathbf{h}_2(s)\,ds, \tag{51}$$

其中φ_0是初始条件．从形式解中得出，$\varphi(t)$服从高斯分布，均值为$\varphi_0-\gamma Ht$，方差为

$$\begin{aligned}\frac{2\gamma_S}{\beta}\left\langle\left[\int_0^t\mathbf{h}_2(s)\,ds\right]^2\right\rangle&=\frac{2\gamma_S}{\beta}\left\langle\int_0^t\int_0^t\mathbf{h}_2(s)\mathbf{h}_2(s')\,dsds'\right\rangle=\frac{2\gamma_S}{\beta}\int_0^t\int_0^t\left\langle\mathbf{h}_2(s)\mathbf{h}_2(s')\right\rangle dsds'\\&=\frac{2\gamma_S}{\beta}\int_0^t\int_0^t\delta(s-s')\,dsds'=\frac{2\gamma_S}{\beta}\int_0^t ds=\frac{2\gamma_S t}{\beta}.\end{aligned} \tag{52}$$

即

$$\rho(\varphi,t)=\sqrt{\frac{\beta}{4\pi\gamma_S t}}\exp\left\{-\beta\frac{\left[\varphi-(\varphi_0-\gamma Ht)\right]^2}{4\gamma_S t}\right\}. \tag{53}$$

如果φ是实数域上的无界变量，则上式的含时概率密度在长时极限下只有平庸解 0，不存在稳定分布. 但在球坐标系中，φ被限定在$[0,2\pi)$区间上，朗之万方程的形式解(51)式中应包含周期边界条件．显然，在周期边界条件的作用下，随机变量$\varphi(t)$的均值也在$[0,2\pi)$区间上．这时，(53)式的高斯概率密度，在长时极限下应该趋于随机变量所在区间上的等概率密度．从而，φ的稳定分布是$[0,2\pi)$区间上的均匀分布$\frac{1}{2\pi}$．于是，系统在球坐标系中总的稳定分布可以得到

$$\rho_{\text{sph}}(\theta,\varphi)=\frac{1}{2\pi}\frac{1}{\tilde{Z}}\exp\left[-\beta\mathcal{H}_{\text{sph}}(\theta)\right]=\frac{1}{Z}\exp\left[\beta SH\cos\theta\right]S^2\sin\theta. \tag{54}$$

这正是球坐标系中的玻尔兹曼分布.

本节对具体的体系进行分析，选取有效朗之万方程的一个特定的形式，从而可以相对简便地求解，以得到稳定的玻尔兹曼分布．这是对文中得到的有效朗之万方程一般形式的一个简单的应用．此外，横场自旋半经典朗之万方程在随机 Landau-Lifshitz 方程之外有更多可能的形式，本节提供了一个具体的例子．

4 结 论

本文以正则系综下的经典玻尔兹曼分布为目标，从朗之万随机微分方程出发，推导出自旋半经典系统有效朗之万方程的一般形式，以及对应的 Fokker-Planck 方程．该有效朗之万方程以玻尔兹曼分布为稳定分布，因此可以正确描述自旋体系在正则系综下的统计物理性质．同时方程中阻尼项和随机项消失时能退回到自旋半经典运动方程，因此也能包含自旋系统的半经典运动模式．这个结果，是对随机 Landau-Lifshitz 方程的推广和补充．在球坐标系中，方程的形式可以简便地判断是否包含纵场效应．在一个单自旋、定值外磁场的具体体系中，成功地应用有效朗之万方程进行统计分布的分析，检验了方程的准确性，同时也为横场自旋朗之万方程在随机 Landau-Lifshitz 方程之外更多的形式上的选择，提供了具体的例子．本文的工作，可以拓宽朗之万随机微分方程作为一种理论和计算工具的应用范围，同时也为自旋半经典系统的动力学和统计力学研究提供理论工具层面的参考．

参考文献

[1] Gilbert T L 2004 *IEEE Trans. Magn.* **40** 3443 https://doi.org/10.1109/TMAG.2004.836740

[2] Antropov V P, Katsnelson M I, van Schilfgaarde M, Harmon B N 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 729 https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.75.729

[3] Antropov V P, Katsnelson M I, Harmon B N, van Schilfgaarde M, Kusnezov D 1996 *Phys. Rev. B* **54** 1019 https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.1019

[4] Ma P-W, Woo C H, Dudarev S L 2008 *Phys. Rev. B* **78** 024434 https://doi.org/10.1103/PhysRevB.78.024434

[5] Guo B, Ding S 2008 *Landau-Lifshitz Equations* (Singapore: World Scientific)

[6] Brown W F 1963 *Phys. Rev.* **130** 1677 https://doi.org/10.1103/PhysRev.130.1677

[7] Kubo R, Hashitsume N 1970 *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **46** 210 https://doi.org/10.1143/ptps.46.210

[8] García-Palacios J L, Lázaro F J 1998 *Phys. Rev. B* **58** 14937 https://doi.org/10.1103/PhysRevB.58.14937

[9] Ma P-W, Dudarev S L 2011 *Phys. Rev. B* **83** 134418 https://doi.org/10.1103/PhysRevB.83.134418

[10] Coffey W T, Kalmykov Y P 2012 *J. Appl. Phys.* **112** 121301 https://doi.org/10.1063/1.4754272

[11] Atxitia U, Hinzke D, Nowak U 2017 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **50** 033003 https://doi.org/10.1088/1361-6463/50/3/033003

[12] Landau L, Lifshitz E 1992 in *Perspectives in Theoretical Physics*, edited by L. P. Pitaevski (Amsterdam: Pergamon) p51

[13] Saslow W M 2009 *J. Appl. Phys.* **105** 07D315 https://doi.org/10.1063/1.3077204

[14] Lakshmanan M 2011 *Phil. Trans. R. Soc. A* **369** 1280 https://doi.org/10.1098/rsta.2010.0319

[15] Eriksson O, Bergman A, Bergqvist L, Hellsvik J 2017 *Atomistic Spin Dynamics: Foundations and Applications* (New York: Oxford University Press)

[16] Risken H 1989 *The Fokker-Planck Equation: Methods of Solution and Applications* (Berlin: Springer-Verlag)

[17] Zwanzig R 2001 *Nonequilibrium statistical mechanics* (New York: Oxford University Press)

[18] Kampen N G v 2009 *Stochastic Processes in Physics and Chemistry* 3rd ed (Amsterdam: Elsevier)

[19] Klyatskin V I 2015 *Stochastic Equations : Theory and Applications in Acoustics, Hydrodynamics, Magnetohydrodynamics, and Radiophysics, Volume 1, Understanding*

Complex Systems (Switzerland: Springer)

[20] Garanin D A, Ishchenko V V, Panina L V 1990 *Theoretical and Mathematical Physics* **82** 169 https://doi.org/10.1007/BF01079045

[21] Garanin D A 1997 *Phys. Rev. B* **55** 3050 https://doi.org/10.1103/PhysRevB.55.3050

[22] Martínez E, López-Díaz L, Torres L, Alejos O 2004 *Physica B* **343** 252 https://doi.org/10.1016/j.physb.2003.08.103

[23] Mayergoyz I D, Bertotti G, Serpico C 2009 *Nonlinear Magnetization Dynamics in Nanosystems* (Amsterdam: Elsevier)

[24] Ma P-W, Dudarev S L, Semenov A A, Woo C H 2010 *Phys. Rev. E* **82** 031111 https://doi.org/10.1103/PhysRevE.82.031111

[25] Evans R F L, Hinzke D, Atxitia U, Nowak U, Chantrell R W, Chubykalo-Fesenko O 2012 *Phys. Rev. B* **85** 014433 https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.014433

[26] Coffey W T, Geoghegan L J 1996 *J. Mol. Liq.* **69** 53 https://doi.org/10.1016/S0167-7322(96)90006-9

[27] Fredkin D R 2001 *Physica B* **306** 26 https://doi.org/10.1016/S0921-4526(01)00958-9

[28] Cheng X Z, Jalil M B A, Lee H K, Okabe Y 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 067208 https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.96.067208

[29] Denisov S I, Sakmann K, Talkner P, Hänggi P 2007 *Phys. Rev. B* **75** 184432 https://doi.org/10.1103/PhysRevB.75.184432

[30] Serpico C, Bertotti G, d'Aquino M, Ragusa C, Ansalone P, Mayergoyz I D 2008 *IEEE Trans. Magn.* **44** 3157 https://doi.org/10.1109/TMAG.2008.2001793

[31] Denisov S I, Polyakov A Y, Lyutyy T V 2011 *Phys. Rev. B* **84** 174410 https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.174410

[32] Giordano S, Dusch Y, Tiercelin N, Pernod P, Preobrazhensky V 2013 *Eur. Phys. J. B* **86** 249 https://doi.org/10.1140/epjb/e2013-40128-x

[33] Aron C, Barci D G, Cugliandolo L F, Arenas Z G, Lozano G S 2014 *J. Stat. Mech.* **2014** P09008 https://doi.org/10.1088/1742-5468/2014/09/P09008

[34] Titov S V, Coffey W T, Zarifakis M, Kalmykov Y P, Titov A S 2021 *J. Magn. Magn. Mater.* **539** 168365 https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2021.168365

[35] Ma P-W, Dudarev S L 2012 *Phys. Rev. B* **86** 054416 https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.054416

[36] Pan F, Chico J, Delin A, Bergman A, Bergqvist L 2017 *Phys. Rev. B* **95** 184432 https://doi.org/10.1103/PhysRevB.95.184432

Study of the generalization of spin semiclassical Langevin equation*

Li De-Zhang [1)] Lu Zhi-Wei [2)] Zhao Yu-Jun [1)] Yang Xiao-Bao [1)] †

1) (Department of Physics, South China University of Technology, Guangzhou 510640, China)

2) (Department of Applied Physics, School of Engineering Sciences, KTH Royal Institute of Technology, Stockholm SE-10691, Sweden)

Abstract

The stochastic dynamics of spin semiclassical system at finite temperature is usually described by stochastic Landau-Lifshitz equation. In this work, the stochastic differential equation for spin semiclassical system is studied. The generalized formulation of effective Langevin equation and the corresponding Fokker-Planck equation are derived. The obtained effective Langevin equation offers an accurate description of the distribution in the canonical ensemble for spin semiclassical system. When the damping term and the stochastic term vanish, the effective Langevin equation reduces to the semiclassical equation of motion for spin system. Hence, the effective Langevin equation can be seen as a generalization of the stochastic Landau-Lifshitz equation. The explicit expressions for the effective Langevin equation and the corresponding Fokker-Planck equation are shown in both Cartesian and Spherical coordinates. It is demonstrated that, the longitudinal effect can be easily illustrated from the expressions in Spherical coordinates. The effective Langevin equation is applied to the simple system of a single spin in a constant magnetic field. In choosing an appropriate form, the Langevin equation can be easily solved and the stationary Boltzmann distribution

can be obtained. The correctness of the Langevin approach to the spin semiclassical system is thus confirmed.

Keywords: stochastic Landau-Lifshitz equation, Langevin equation, Fokker-Planck equation, Boltzmann distribution

* Project supported by Guangdong Basic and Applied Basic Research Foundation (Grant No. 2021A1515010328), Key-Area Research and Development Program of Guangdong Province (Grant No. 2020B010183001) and National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12074126).